

**CHAMADA FAPERÓ PBIC/PBIT No. 009/2022**

**PLANO DE TRABALHO 2**

## PLANO DE TRABALHO 2

TÍTULO PLANO DE TRABALHO: Cálculos *ab-initio*: recursos computacionais na análise vibracional de grupos moleculares

TÍTULO DO PROJETO: Cálculos *ab-initio* via método DFT: análise espectral vibracional e conformacional de ácidos graxos

Coordenador: Quesle da Silva Martins

Área: Ciências exatas e da Terra

Área de concentração: Física da matéria condensada

Faixa de enquadramento: PBIC

Instituição executora: Fundação Universidade Federal de Rondônia - UNIR

---

### 1. INTRODUÇÃO

No estudo das vibrações moleculares, pode-se conhecer os padrões oscilatórios de diversas moléculas com base na energia eletromagnética envolvida no fenômeno. Assim podemos obter respostas gráficas de forma qualitativa e indicar a presença dos mais diversos grupos moleculares existentes numa determinada amostra.

Os cálculos *ab initio* são inseridos num estudo, quando se deseja obter respostas efetivas, baseadas no conjunto teórico já existente. O método é apropriado em análises de sistemas moleculares com muitos elétrons, o que seria impraticável de forma analítica devido ao grande número de elementos interagentes. Sob esse contexto, o método DFT (Density Functional Theory) é empregado na análise conformacional de grupos moleculares de interesse. A análise vibracional, é uma etapa importante para identificar qual o padrão de menor energia produzido pelo cálculo computacional, sob parâmetros pré-estabelecidos.

A rotina empregada para o estudo em questão, possibilitará a formação básica no estudo dos espectros vibracionais gerados, incorporando assim, todo campo da espectroscopia vibracional e também a análise conformacional, que é uma etapa importante para identificar qual o padrão de menor energia produzido pelo cálculo computacional, sob parâmetros pré-estabelecidos possibilitando a

correta interpretação de resultados experimentais, assim como: análise qualitativa da identificação da(s) amostra(s), suas principais características físico-químicas e contextos potenciais de aplicações futuras; Identificação de componentes majoritários de amostras estudadas com base no tema central do projeto; Cálculos computacionais sob o método DFT; e análise vibracional via DFT de estruturas obtidas.

A compreensão de técnicas computacionais (e experimentais) proporciona uma interação interdisciplinar entre cursos das ciências exatas, assim, podendo ser estudada de forma paralela em áreas correlatas visando diversas aplicações.

## 2. OBJETIVO(S)

Geral:

→ O desenvolver habilidades e domínio na aplicação do método DFT na investigação vibracional de grupos moleculares:

Específicos:

→ Conhecer teorias relacionadas, seu desenvolvimento, importância e aplicações na Física e ciências em geral.

→ Estudar fundamentos básicos do método DFT, aplicações, tecnologias associadas e cálculos *ab initio*.

→ Obter análises vibracional dos grupos moleculares compreendidos no âmbito da pesquisa;

→ Contribuir para a formação científica, profissional e pessoal do educando;

→ Incorporar na rotina do aluno de graduação conceitos da pesquisa científica, como a leitura de artigos científicos, revistas especializadas, *softwares* etc;

## 3. METODOLOGIA

As atividades ocorrerão no Laboratório de Física Aplicada do DEFIJI, no Laboratório do Grupo de Pesquisa Estrutura da Matéria e Física Computacional e, quando necessário, por videoconferência.

As atividades se baseiam em preparar o bolsista para a instrução específica ao qual ele deverá executar ao longo do período de projeto, conceituando as teorias, os fundamentos básicos para a pesquisa, fundamentos de cálculos *ab initio*, método DFT, composição e estruturas moleculares.

Verificação de escrita através de relatórios diários de atividades e apresentação de seminários, dando-lhe suporte para seguir as atividades do cronograma sem impedimentos, minimizando as dificuldades encontradas.

Sanadas as lacunas iniciais na preparação específica para cada caso, o bolsista seguirá à constituição de sua responsabilidade no projeto de pesquisa, seguindo as etapas conforme indicada em cronograma estabelecido.

#### 4. CRONOGRAMA DAS AÇÕES A SEREM DESENVOLVIDAS

Tabela 1. Cronograma geral de atividades do plano de trabalho 2.

Edital/Chamada FAPERRO PBIC/PBIT N°. 003/2022 (ID 0030489437)												
Atividades	Mês											
	1°	2°	3°	4°	5°	6°	7°	8°	9°	10°	11°	12°
Introdução bibliográfica/método científico	X	X										
Cálculos ab-initio/método DFT	X	X	X	X	X							
Conhecendo recursos de máquina/ <i>softwares</i>		X	X	X	X							
Aplicações/análise vibracional			X	X	X	X						
Estruturas e moléculas/ácidos graxos/arquivos executáveis			X	X	X	X						
Simulação/modelagem/recursos computacionais					X	X	X	X	X			
Resultados/análise vibracional/conformacional						X	X	X	X	X		
Resultados/análise do método						X	X	X	X	X		
Resultados/divulgação científica/seminários/relatórios/artigos/resumos etc									X	X	X	X

